

## СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ L-ГИСТИДИНА С ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

*Курицына А.А.<sup>(1)</sup>, Баделин В.Г.<sup>(2)</sup>, Тюнина Е.Ю.<sup>(2)</sup>, Тарасова Г.Н.<sup>(2)</sup>*

<sup>(1)</sup> Ивановский государственный химико-технологический университет

153000, г. Иваново, пр. Шереметевский, д. 7

<sup>(2)</sup> Институт химии растворов РАН

153045, г. Иваново, ул. Академическая, д. 1

Изучение механизмов и движущих сил образования комплексов между лекарственными средствами и макромолекулярными белками, молекулярных процессов транспортировки лекарств, доставки их к клеткам-мишеням относится к приоритетным задачам химии, биологии и фармакологии. В рамках долгосрочной задачи по исследованию различных аспектов взаимодействия между модельными соединениями белков и лекарственных средств, мы представляем результаты спектроскопического исследования водных растворов, содержащих гетероциклические соединения: L-гистидин (His) с имидазольной группой в боковой цепи молекулы, никотиновую кислоту (NA) как витамин PP и урацил (Ura), который является основной структурной компонентой РНК и производные которого обладают противоопухолевыми и противовирусными свойствами.

Методом УФ- спектроскопии получены электронные спектры поглощения His в присутствии NA и Ura с использованием спектрофотометра Specord M-40 (Германия) с кварцевыми кюветами с длиной оптического пути 0.1см относительно воды при 296 К. Исследования проводили в водных растворах при  $pH=7,3$ , в условиях близких к реальным биологическим системам. Взаимодействие реагентов изучали на максимуме длины поглощения лигандов при постоянной концентрации His ( $2,5 \cdot 10^{-4}$  моль/л) и варьируемой концентрации лиганда ( $2,5 \cdot 10^{-4}$ - $2,0 \cdot 10^{-2}$  моль/л). Вычислена оптическая плотность максимума полосы поглощения комплекса в каждом из растворов, учитывая поглощение исходных компонентов. Определены константы связывания и стехиометрический состав образующихся комплексов. Константы устойчивости образующихся комплексов рассчитаны на основе кривых насыщения с использованием компьютерной программы FTMT для трех моделей со стехиометрическим составом комплексной частицы 1:1, 1:2 и 1:3. Показано, что наилучшее согласование экспериментальных и рассчитанных значений наблюдается для стехиометрии 1:2.

Определены формы существования взаимодействующих реагентов в водном растворе с  $pH=7,3$ . Показано, что образование молекулярных комплексов между цвиттерионом His и лигандами, находящимися в анионной (NA) и молекулярной (Ura) формах, может осуществляться за счет нековалентных взаимодействий (водородные связи, Ван-дер-Ваальсовы, стэкинг-эффекты, электростатические взаимодействия). Выявлено, что взаимодействие гистидина с урацилом приводит к образованию несколько более устойчивых комплексов, чем с никотиновой кислотой.